

# Chimie théorique



Niveau  
d'étude  
BAC +2



ECTS  
3 crédits



Composante  
Faculté des  
sciences

## En bref

- › Langue(s) d'enseignement: Français
- › Ouvert aux étudiants en échange: Oui

## Présentation

### Description

L'UE se compose d'une matière enseignée sur 2 périodes : Chimie théorique P9 (CM, TD) et Chimie théorique P10 (CM, TD)

### Objectifs

#### Période 9

A l'échelle moléculaire, la chimie est essentiellement une histoire d'électrons. Comment quelques électrons peuvent former des édifices, les molécules, aussi stables ? Qu'est-ce qu'une liaison chimique ? Pourquoi certaines molécules réagissent entre elles ? Peut-on prédire le résultat de ces réactions ? Ce cours a pour but de présenter la seule théorie décrivant correctement la structure électronique : la mécanique quantique !

Contenus : Notions de quantification et de dualité onde-corpuscule. Équation de Schrödinger pour la boîte de potentiel et pour l'atome d'hydrogène. Diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par combinaison linéaire d'orbitales atomiques.

#### Période 10

A l'échelle moléculaire, la chimie est essentiellement une histoire d'électrons. Comment quelques électrons peuvent former des édifices, les molécules, aussi stables ? Qu'est-ce qu'une liaison chimique ? Pourquoi certaines molécules réagissent entre elles ? Peut-on prédire le résultat de ces réactions ? Ce cours a pour but de présenter la seule théorie décrivant correctement la structure électronique : la mécanique quantique !

Contenus : Connaître la structure électronique des atomes du groupe principal. Connaître la structure électronique (diagramme d'orbitales moléculaires) de fragments simples (H<sub>2</sub>, H<sub>3</sub>, AH<sub>2</sub>, AH, AH<sub>3</sub>). Utiliser de façon pertinente le

vocabulaire particulier de cette matière. Connaître la structure électronique (diagramme d'orbitales moléculaires) de molécules diatomiques du groupe principal. Distinguer les éléments de symétrie au sein d'une molécule. Faire le lien la structure électronique, la réactivité, le schéma de Lewis, la notion de valence et d'atome. Comprendre la différence entre CLOA et hybridation. Construire une structure plus complexe à partir de fragments simples.

## Pré-requis obligatoires

### Période 9

#### Notions et contenus

Le cours fait largement appel aux savoirs basiques en atomistiques : modèle atomique de Bohr, formules développées et notions de liaisons covalentes. Ce cours sera l'occasion de revoir les méthodes VSEPR et d'hybridation,

Concernant le bagage mathématique les concepts essentiels sont : équation différentielle aux valeurs propres, opérateurs et matrices. Mais ils seront représentés lors du cours.

### Période 10

#### Notions et contenus

Le cours fait largement appel aux savoirs basiques en atomistiques : modèle atomique de Bohr, formules développées et notions de liaisons covalentes.

Il poursuit de plus l'UE Chimie théorique 1, où les notions fondamentales de mécanique quantique sont présentées ainsi que le principe des diagrammes d'orbitales moléculaires.

#### Compétences

- Mobiliser les concepts essentiels des mathématiques, de la physique et de l'informatique dans le cadre des problématiques de la chimie.
- Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique.

## Compétences visées

### Période 9

# Mobiliser les concepts essentiels des mathématiques, de la physique et de l'informatique dans le cadre des problématiques de la chimie.

# Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique.

### Période 10

Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique. Relier un phénomène macroscopique aux processus microscopiques.

## Liste des enseignements

	Nature	CM	TD	TP	Crédits
Chimie théorique	Matière	14,7h	13,3h		3 crédits

## Infos pratiques

## Lieu(x)

> Angers

## Campus

> Campus Belle-beille